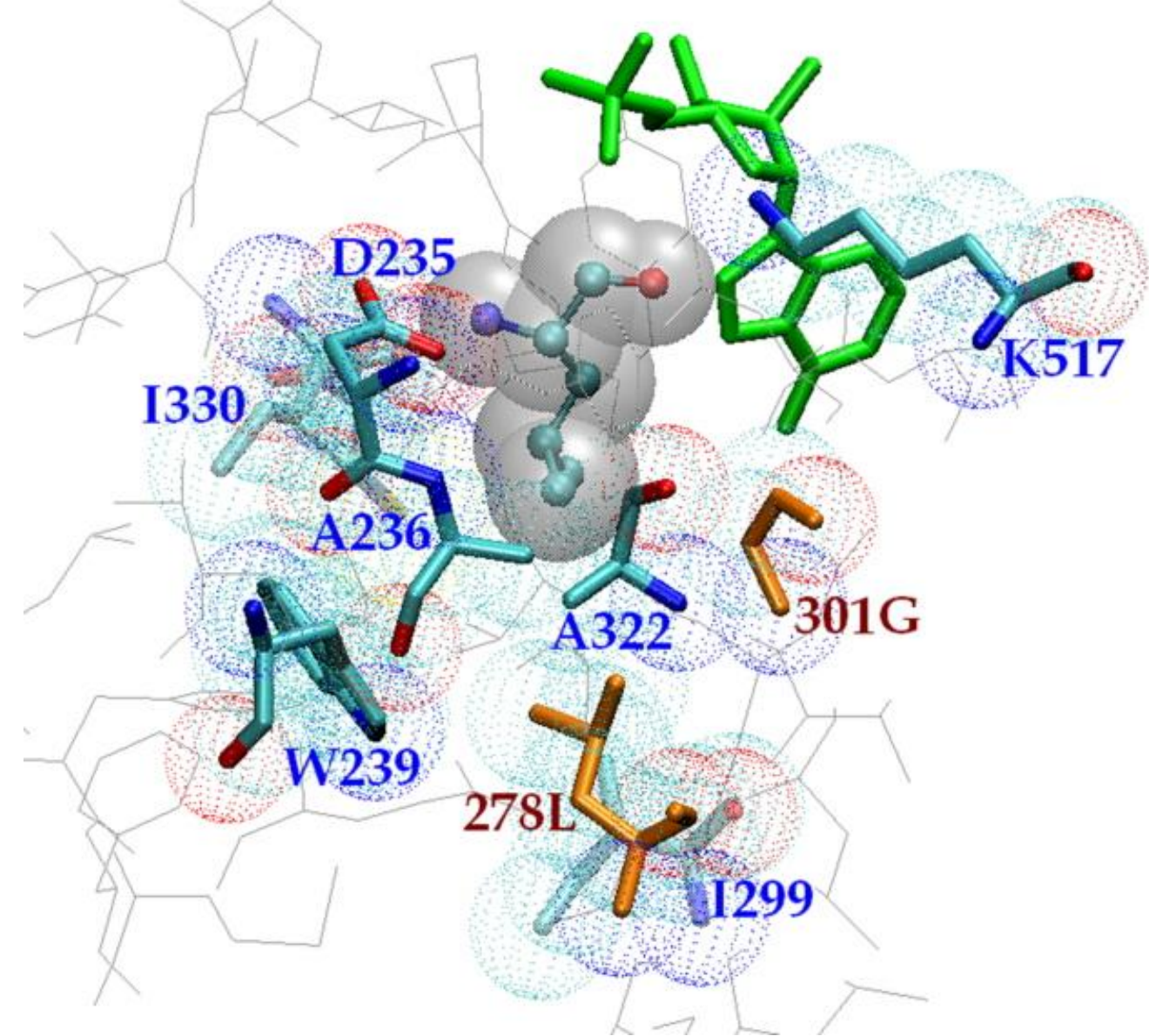
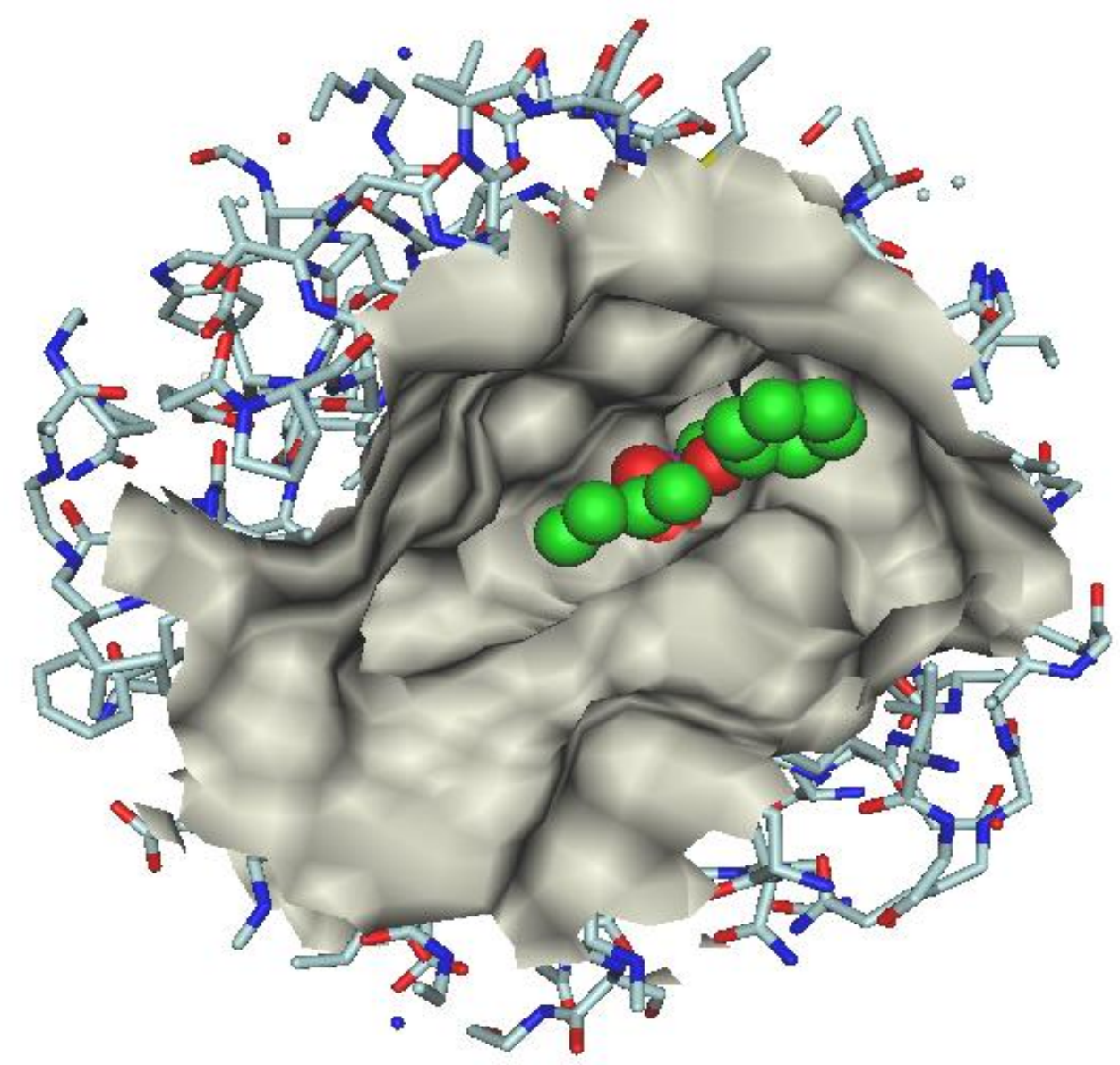


3D struktura kao ključ razvoja novih lijekova

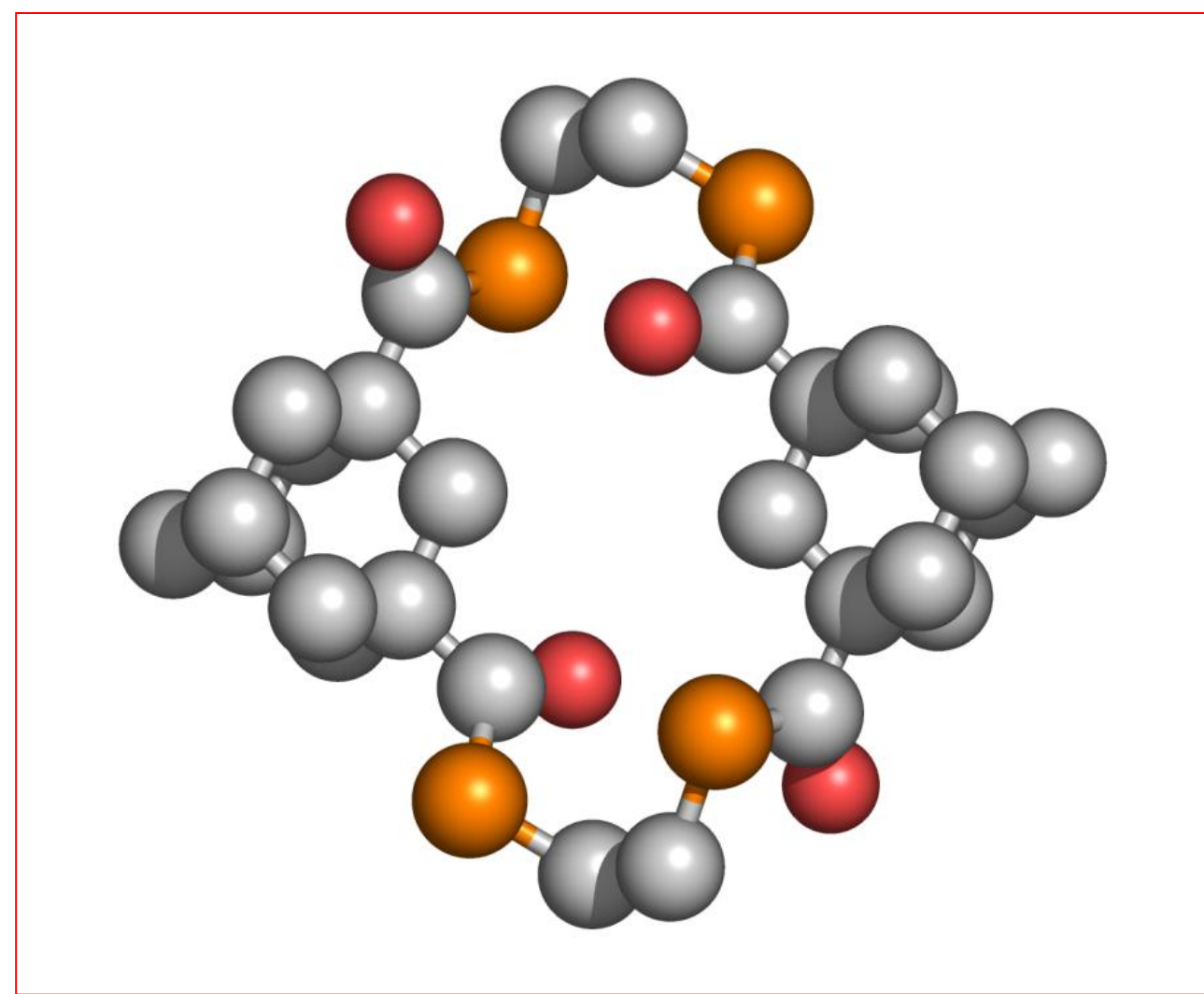
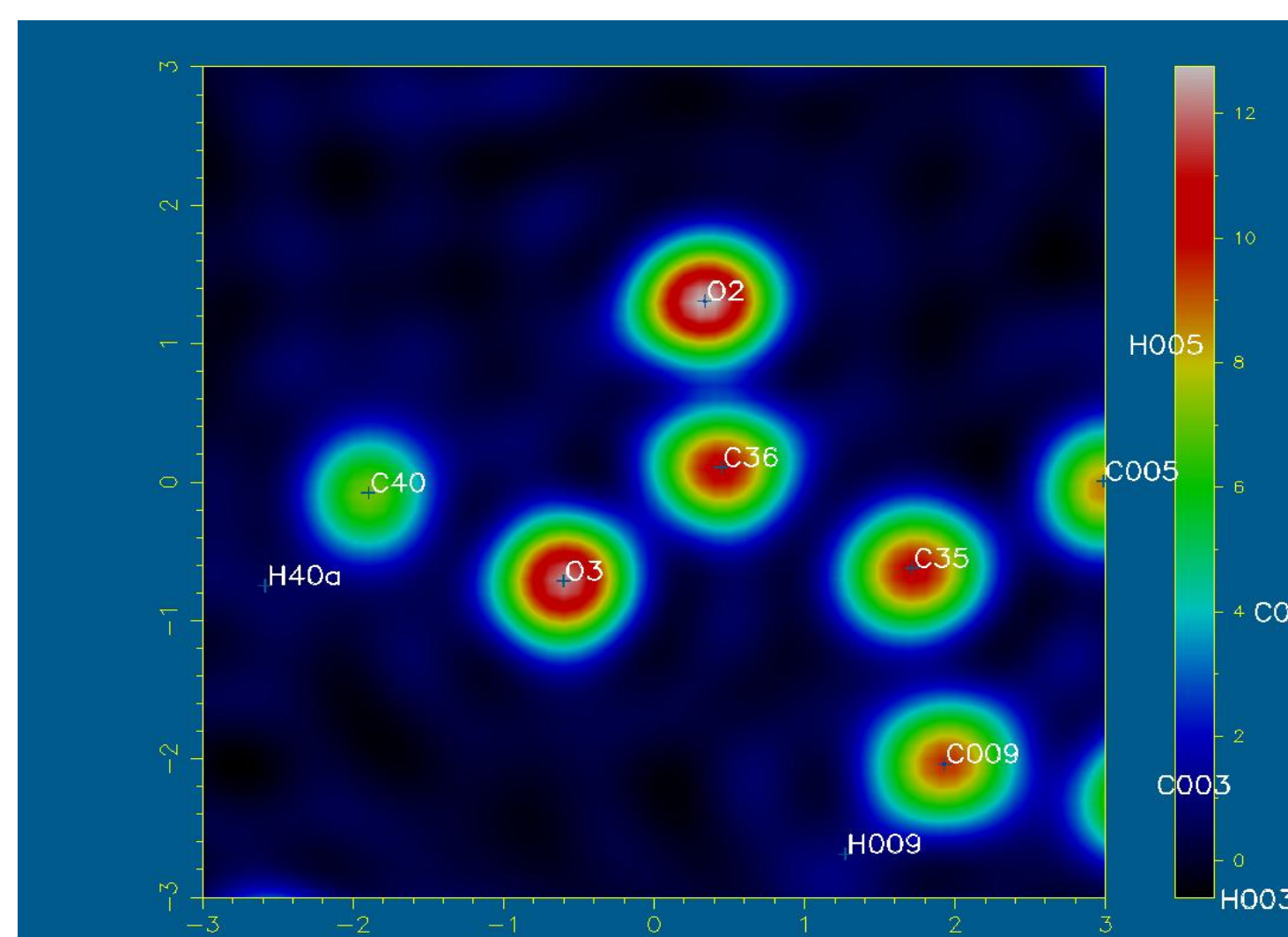
ŠTO SU ZAPRAVO LIJEKOVI?

To su obično male molekule koje se vežu za proteine ili nukleinske kiseline u organizmu, te, modificirajući njihovu funkciju, priječe razvoj bolesti. Da bismo predvidjeli gdje će se i kako mala molekula vezati, moramo znati detalje njezine strukture, ali i strukture molekule domaćina (proteina). Strukture nam otkriva rendgenska strukturna analiza.

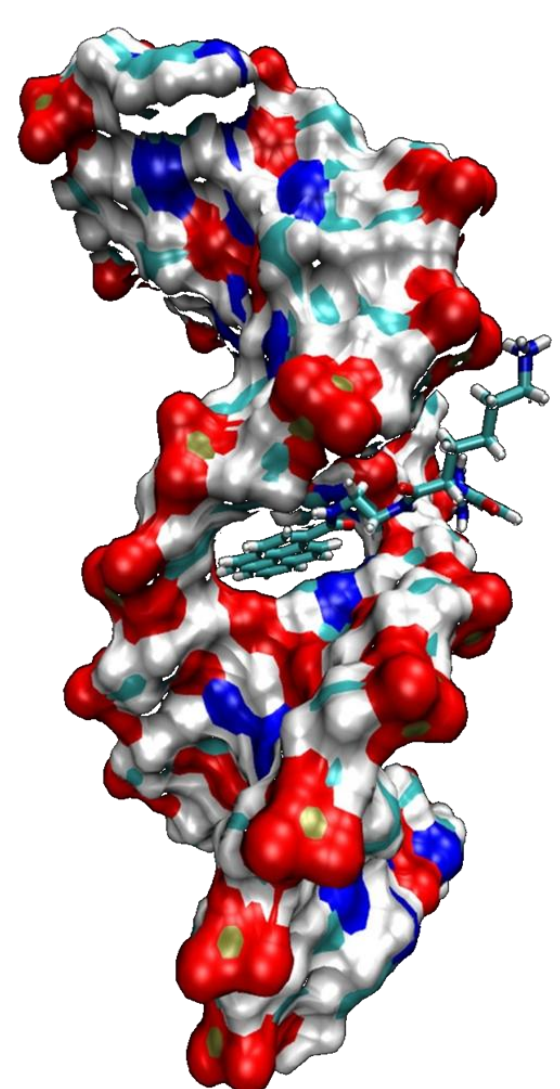


OD DIFRAKCIJSKE SLIKE DO MODELA MOLEKULE

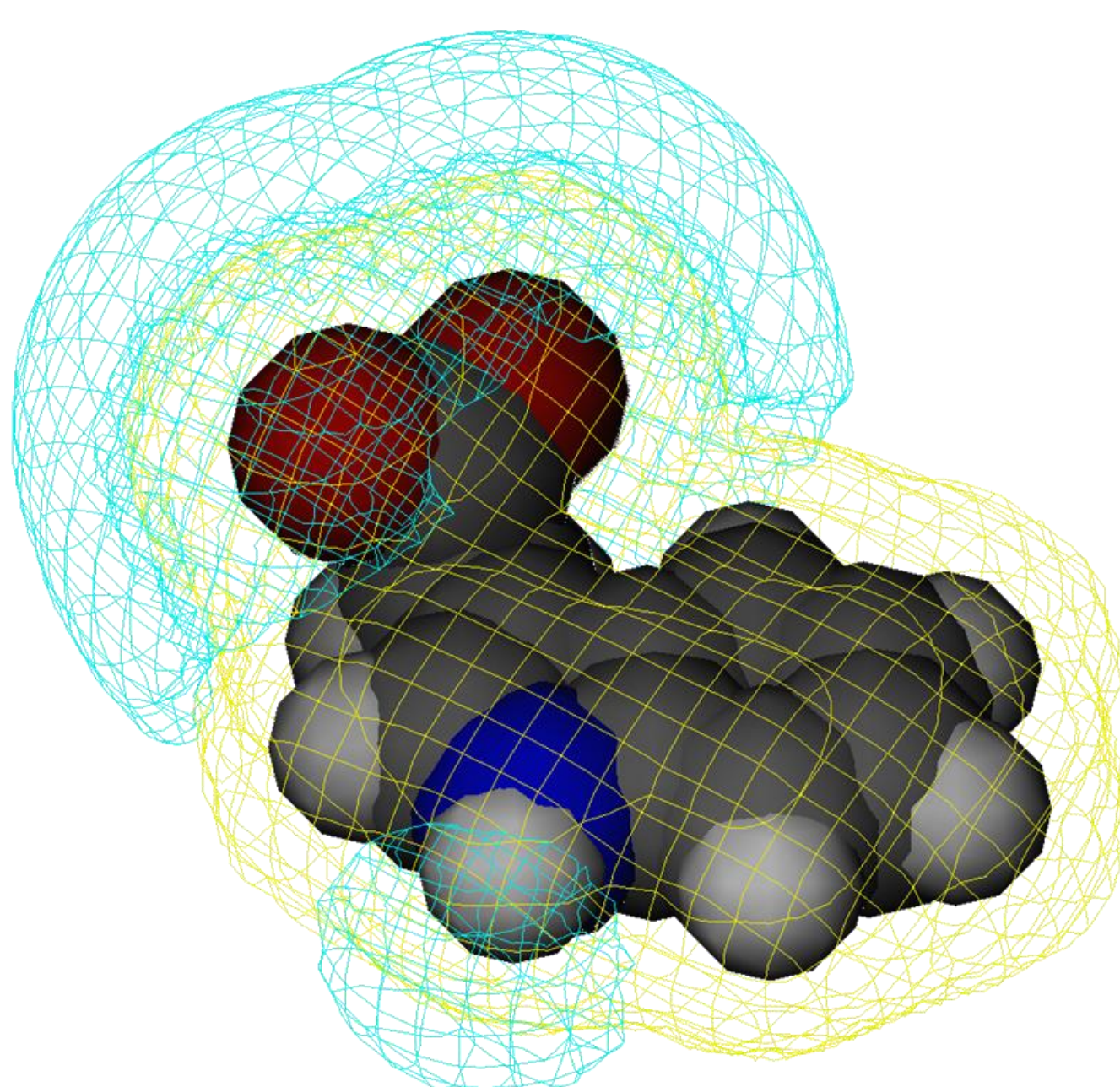
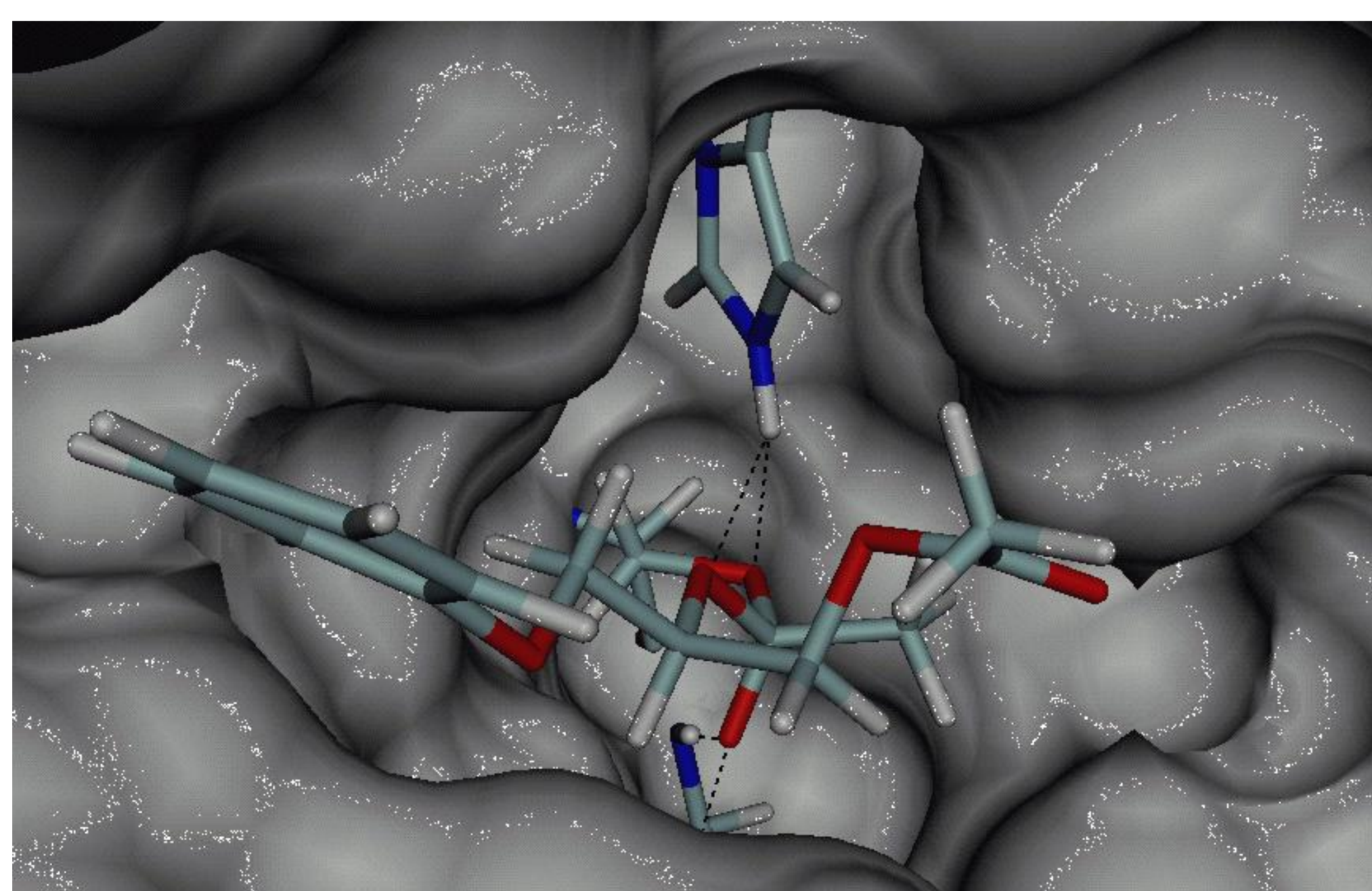
Iz difrakcijske slike računamo gustoću elektrona u kristalnoj strukturi. Maksimumi elektronske gustoće odgovaraju položajima atoma u molekuli. A onda, atom po atom, uz malo kemijskog znanja, kristalograf slaže 3D model molekule (slika dolje desno).



MOLEKULSKO MODELIRANJE DOPUNJUJE STRUKTURU

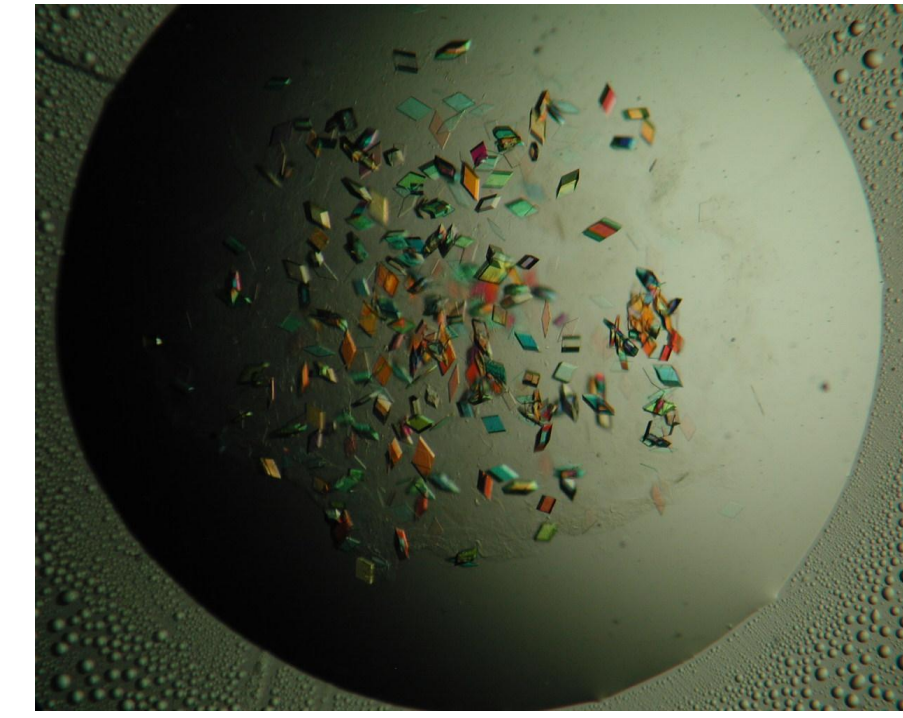


Računalnim metodama (molekulskim modeliranjem) istražuje se dinamičko međudjelovanje male molekule (potencijalnog lijeka) i biološkog domaćina (proteina ili DNK) s ciljem razumijevanja djelovanja lijekova na molekularnoj razini (slike lijevo i dolje). Na taj način se strukturna informacija koju daje rendgenska strukturna analiza dopunjuje slikom o međudjelovanju u vremenu (slika desno).

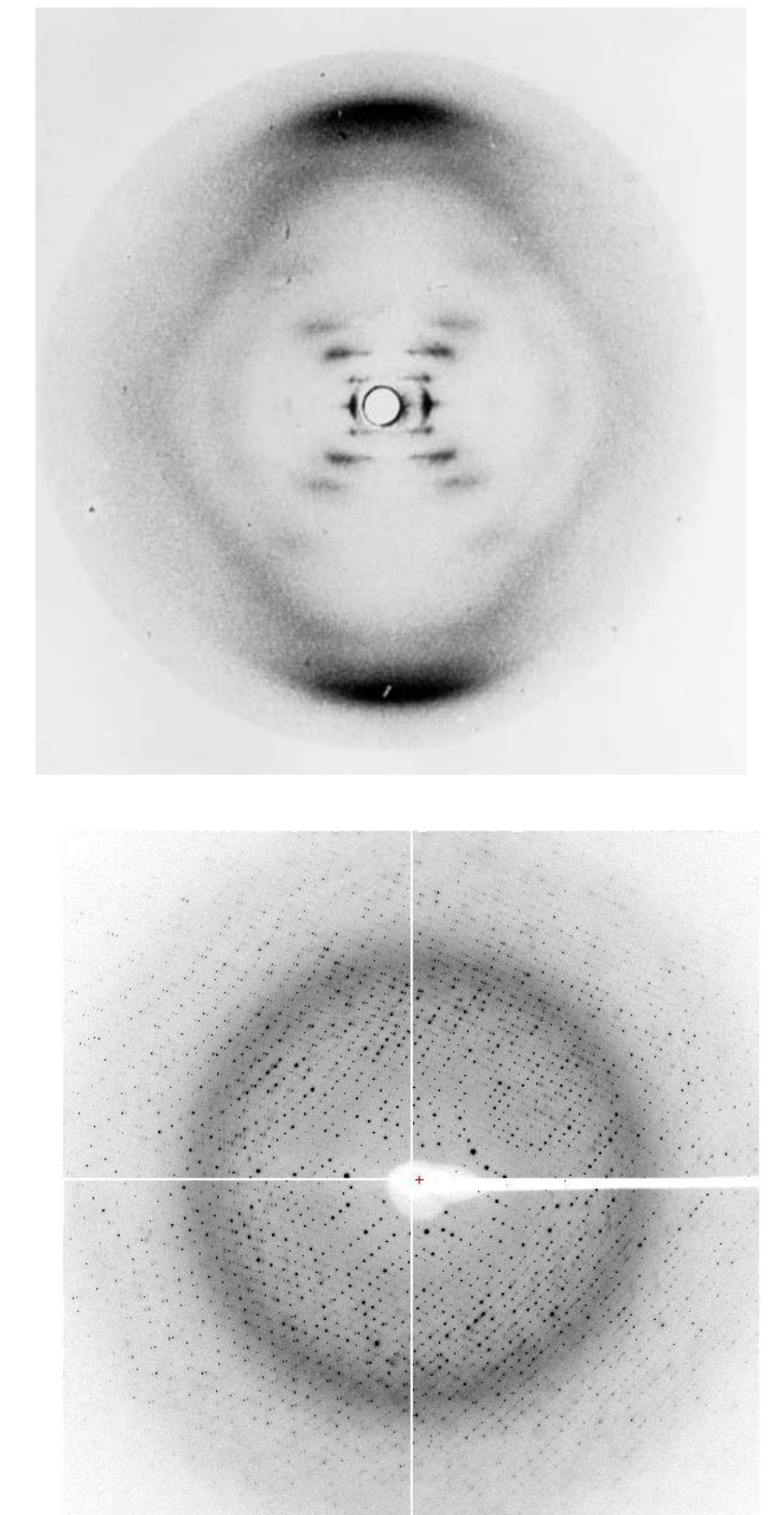
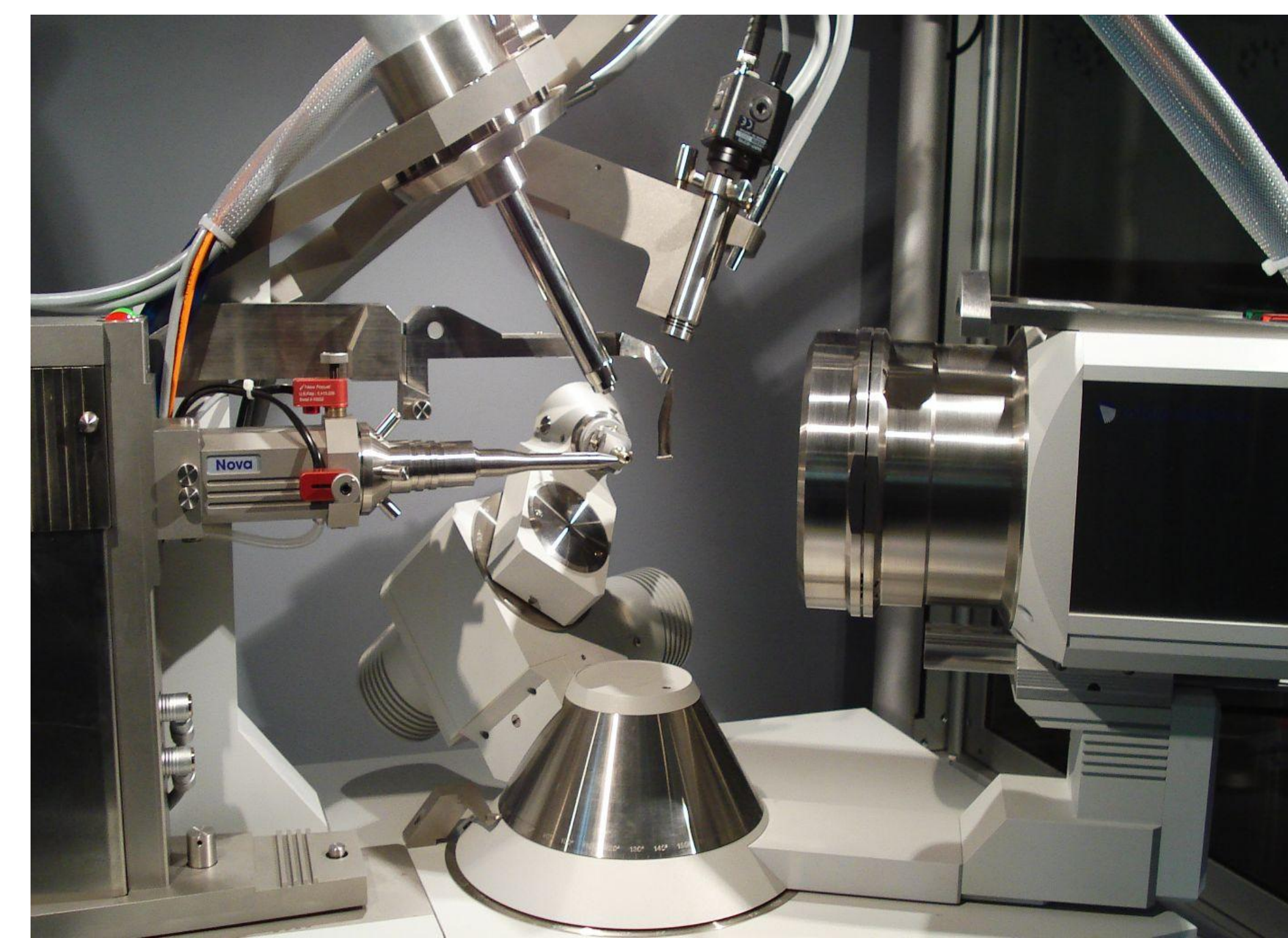


NIŠTA BEZ KRISTALA

Priprava kristala je prvi korak u rendgenskoj strukturnoj analizi. Kristali kriju tajnu molekularne strukture koju možemo otkriti pomoću difrakcije rendgenskih zraka.



KAKO RENDGENSKE ZRAKE “VIDE” MOLEKULE U KRISTALIMA?



Kristal stavimo u snop rendgenskog zračenja na uređaju koji se zove difraktometar. Goniometar (na slici gore) omogućuje vrtnju kristala tako da ga rendgenske zrake obasjaju sa svih strana. Rezultat snimanja je difrakcijska slika.

